Karlsruher Institut für Technologie
Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. König

Blatt 3
Besprechung 13.11.2014

---

1. LCAO-Näherung für Wannier-Funktionen (6 + 6 = 12 Punkte)

(a) Betrachten Sie ein quadratisches Gitter (in zwei Raumdimensionen) mit Gitterkonstante a. Das atomare Potential $U_a(\mathbf{r})$ sei isotrop. Für Elektronen steht nur ein einziges atomares s-Orbital zur Verfügung. Ausgehend von der LCAO-Näherung, bestimmen Sie das Spektrum $E_\mathbf{k}$ für den Fall, dass in Überlappintegralen Tunneln zwischen nächsten Nachbarn ($|\mathbf{R}| = a$) sowie zwischen die übernächsten Nachbarn ($|\mathbf{R}| = \sqrt{2}a$) berücksichtigt wird.

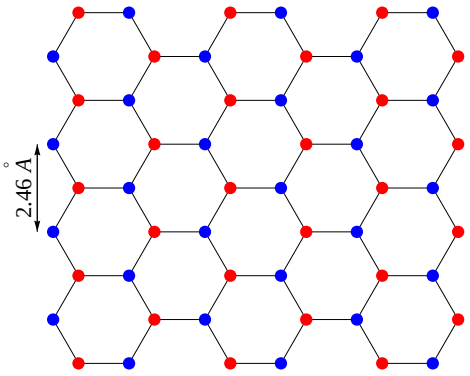
(b) Das Gitter sei nun einfach kubisch in drei Raumdimensionen und es sollen nur Überlappintegralen zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt werden; $U_a(\mathbf{r})$ sei isotrop. Betrachten Sie ein dreifach entartetes p-Orbital, $E_n = E_p$, $n = 1; 2; 3$, wobei als atomare p-Wellenfunktionen des Elektrons die Funktionen

$$\phi_1(\mathbf{r}) = x\varphi(|\mathbf{r}|), \quad \phi_2(\mathbf{r}) = y\varphi(|\mathbf{r}|), \quad \phi_3(\mathbf{r}) = z\varphi(|\mathbf{r}|),$$

gewählt werden können; $\varphi(|\mathbf{r}|)$ sei bekannt. Zeigen Sie nun, dass, allein aufgrund der Invarianz des atomaren Potentials unter bestimmten Symmetrietransformationen des Gitters, die Gleichung für das Spektrum in drei ungekoppelte Gleichungen zerfällt. Bestimmen Sie $E_\mathbf{k}$.

2. Bandstruktur von Graphen (6 + 6 + 6 = 18 Punkte)

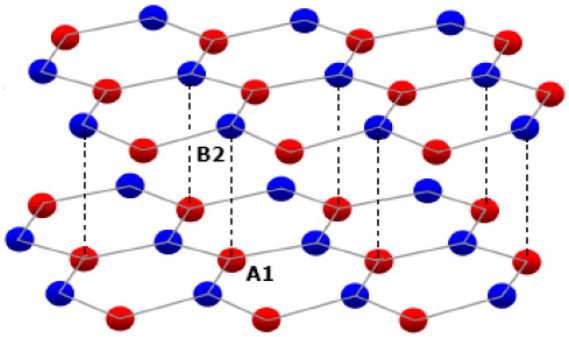
Die grundlegenden physikalischen Eigenschaften von Graphen können in der einfachsten "Tight-Binding"-Näherung beschrieben werden, in der Elektronen jeweils nur zwischen nächsten Nachbarn hin- und herspringen. Die Einheitszelle von Graphen beinhaltet 2 Atome, die aus Symmetriegründen komplett äquivalent sind. Diese Atome (rote und blaue Punkte in der Abbildung) bilden auch die nächsten Nachbarn im Graphen-Gitter.



(a) Bestimmen Sie den Hamiltonoperator von Graphen in der "Tight-Binding"-Näherung. Finden Sie die Bloch-Funktionen, die periodisch im reziproken Bravais-Gitter sind, und drücken sie den Hamiltonoperator in der Basis dieser Bloch-Funktionen aus. Das Ergebnis lässt sich dann als 2×2-Matrix schreiben.

(b) Ausgehend von der "Tight-Binding"-Näherung, finden Sie die Bandstruktur von Graphen. Zeigen Sie, dass die Bandlücke an besonderen Punkten der 1. Brillouin-Zone verschwindet, und das Spektrum dort als linear genähert werden kann.

(c) Bestimmen Sie nun die Bandstruktur für den Fall, dass in Überlappintegralen auch die übernächsten Nachbarn berücksichtigt werden.

3. Bonusaufgabe: Graphen-Doppelschicht (5 Bonuspunkte)

Bestimmen Sie die Bandstruktur der Doppelschicht von Graphen mit "Bernal-Stapelung". Die Geometrie dieser Stapelung impliziert, dass in führender Ordnung auch Tunnelmatrixelemente zwischen roten (A1) Atomen der ersten und blauen (B2) Atomen der zweiten Graphenschicht berücksichtigt werden müssen (s. Abbildung).